

Исходя из экспериментальных данных, для анализа полей напряжений в качестве исследуемой системы был выбран мультиполь с расстоянием между квадруполом и диполем $m_1 = 6$ нм и длиной квадруполя $m_2 = 12$ нм (рис. 2 а). Как следует из рисунка 2, мультипольная конфигурация является сложной экранированной системой с преимущественной локализацией полей напряжений в области залегания дисклинаций с максимальными значениями $P \approx E/50$, близкими к таковым для нанодиполя.

Для оценки устойчивости различных дисклинационных конфигураций проведен сравнительный анализ распределения удельной упругой энергии дисклинационных конфигураций, формирующихся в процессе продвижения нанодиполя частичных дисклинаций. Результаты такого анализа представлены на рисунке 2 б. Из этих расчетов следует, что имеются значительные различия в энергиях как квадрупольных, так и мультипольных конфигураций по сравнению с нанодиполем частичных дисклинаций в широком интервале размеров (длин) квадруполов. При этом энергия мультипольных конфигураций оказывается в несколько раз меньше энергии нанодиполя (рис. 2 б).

Исходя из проведенного анализа особенностей упруго – напряженного состояния и энергий рассмотренных дисклинационных конфигураций, предложен механизм локализации деформации в области упругих дисторсий, представляющий собой квазипериодическую последовательность формирования и релаксации дисклинационных ансамблей различного типа с периодическим изменением энергии дефекта.

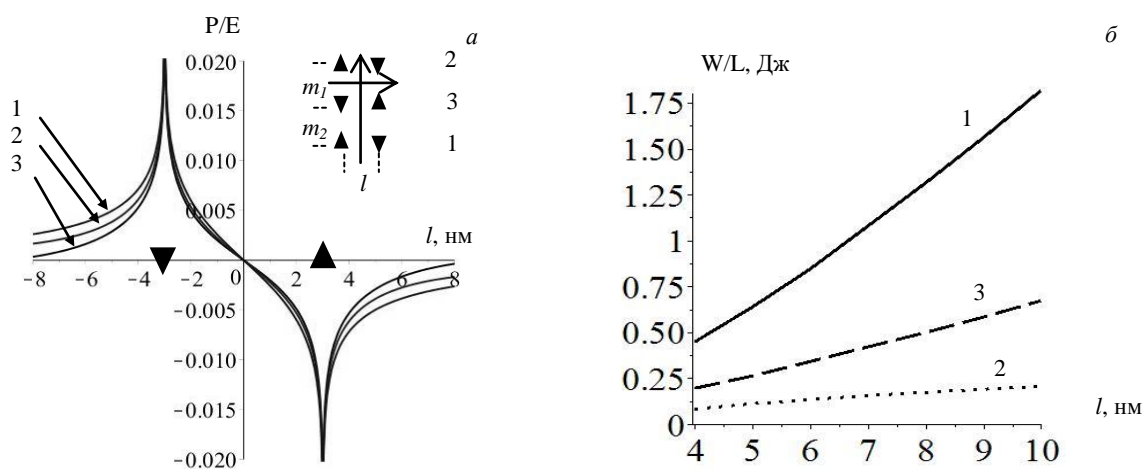


рис. 2. Пространственное распределение давления $P = (\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33})/3$ мультиполя частичных клиновых дисклинаций с параметрами $l = m_1 = 6$ нм, $m_2 = 12$ нм, $\omega \approx 1^\circ$ в различных плоскостях залегания диполей (а); энергия нанодиполя – кривая 1, квадруполя с фиксированным плечом $m = 6$ нм – кривая 2 и мультиполя с фиксированными плечами $m_1 = 6$ нм, $m_2 = 12$ нм – кривая 3 (б).

Список публикаций:

- [1] Тюменцев А.Н. Нанодиполи частичных дисклинаций как носители квазивязкой моды деформации и формирования нанокристаллических структур при интенсивной пластической деформации металлов и сплавов / А.Н. Тюменцев, И.А. Дитенберг // Физическая мезомеханика. – 2011. – Т. 14, № 3. – С. 55–68.
- [2] Тюменцев А.Н. Структурные состояния с высокой кривизной кристаллической решетки в субмикроструктурных и нанокристаллических металлических материалах / А.Н. Тюменцев, И.А. Дитенберг // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2011. – Т. 54, № 9. – С. 26–36.

Корреляция оптических свойств и радиационно-индуцированного структурного беспорядка в ионно-имплантированном кварцевом стекле SiO_2 / Re

Тарасюк Владислав Олегович

Бирюков Дмитрий Юрьевич, Зацепин Анатолий Федорович

Уральский федеральный университет

Зацепин Анатолий Федорович

newparin@yandex.ru

В растущих отраслях оптоэлектроники и фотоники находят широкое применение композиционные функциональные материалы на основе диоксида кремния (например, структуры с квантовыми точками), которые могут быть созданы с использованием технологии ионной имплантации [1]. Ионно-лучевое воздействие сопровождается образованием наноразмерных кластеров и точечных дефектов, которые

существенно влияют на оптические свойства материала. Вместе с тем, ионная имплантация, как и любое корпускулярное воздействие, приводит к разупорядочению атомной структуры материала.

Целью работы явилось исследование поведения оптических спектров кварцевого стекла в УФ-диапазоне при имплантации ионами Re^+ .

В качестве подхода для анализа радиационно-индуцированного беспорядка в стеклообразных материалах может быть рассмотрена интерпретация спектрально-температурного поведения оптических спектров неупорядоченных материалов на основе принципа эквивалентности статического и динамического слагаемых общего атомного беспорядка [2, 3]

$$E_0(T, X) = D(\langle u^2 \rangle_X + \langle u^2 \rangle_T), \quad (1)$$

где $\langle u^2 \rangle_X$ и $\langle u^2 \rangle_T$ – среднеквадратичные смещения атомов решетки из положения равновесия, связанные с динамическим (тепловые фононы) и статическим ("замороженные" фононы) разупорядочением соответственно. Множитель D имеет смысл константы деформационного потенциала второго порядка. Величина E_0 – логарифмического наклона спектральной кривой характеризует усредненную размытость зонных хвостов, имеющую место в следствии нарушений атомного беспорядка [2, 4].

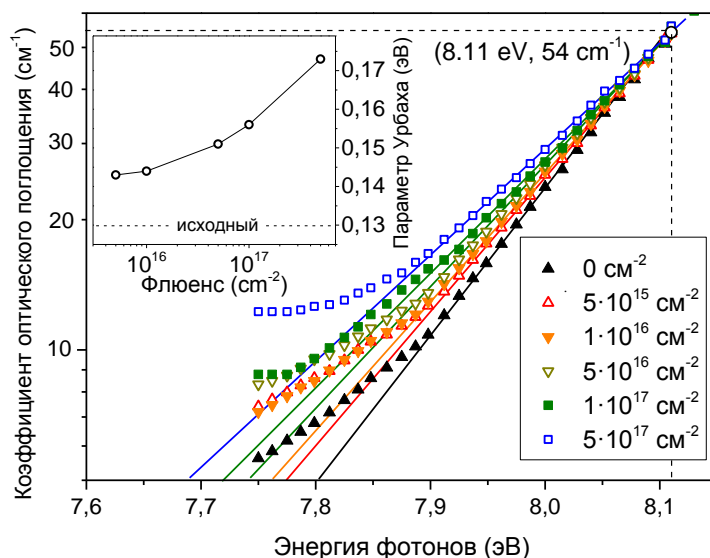


рис.1. Спектры оптического поглощения кварцевого стекла, имплантированного ионами Re . Возле соответствующих символов указаны значения флюенса Φ . На врезке приведена зависимость параметра Урбаха E_0 от флюенса ионов.

Измерения УФ-спектров поглощения стекол (рис. 1) проводились на ВУФ спектрометре McPherson VuVAS 1000 с дейтериевой лампой в качестве источника света. Полученные экспоненциальные зависимости могут быть описаны с помощью правила Урбаха [5], в соответствии с которым спектрально-дозовая зависимость края поглощения может быть представлена экспоненциальной зависимостью общего вида [2, 3]:

$$\alpha(h\nu, T, X) = \alpha_0 \exp\left(\frac{h\nu - E_g(T)}{E_0(T, X)}\right), \quad (2)$$

где α_0 – константа, $h\nu$ – энергия фотонов, $E_g(T)$ – температурная функция ширины оптической щели, $E_0(T, X)$ – параметр Урбаха или функция суммарного беспорядка (1), присутствующего в системе.

Параметр X в настоящей работе используется для обозначения статического беспорядка. По аналогии с обычной температурой, используемой для обозначения динамической составляющей беспорядка, он может иметь смысл эффективной температуры, при которой замораживается фононный беспорядок и которая, таким образом, может количественно охарактеризовать статическую разупорядоченность структуры материала.

На рис. 1 виден характерный для динамического беспорядка Урбаховский веер по Φ при комнатной температуре и монотонное возрастание параметра беспорядка E_0 , соответствующее радиационно-индуцированному разупорядочению матрицы стекла. Согласно выражениям (1) и (2) это свидетельствует о том, что параметры T и X абсолютно равноправны и статический беспорядок системы имеет схожие с динамическим беспорядком закономерности.

Таким образом, считая, что параметр E_0 отражает общий беспорядок в матрице кварцевого стекла, можно заключить, что величина флюенса ионов соответствует вполне определенной равновесной температуре

структурного разупорядочения. Иными словами, модификация оптических спектров, имеющая место в исследуемых образцах под действием ионно-лучевой имплантации, успешно анализируется в рамках обобщенного правила Урбаха с учетом принципа эквивалентности статического и динамического беспорядка.

Список публикаций:

- [1] Zhang J. Zn. / *Optical properties and spectroscopy of nanomaterials*. // World Scientific Publ. Co Pte. Ltd, 2009. 383 p.
- [2] Вайнштейн И. А., Зацепин А. Ф., Кортов В. С. // ФТТ. 2001. Т. 43. № 2. С. 237.
- [3] Zatsepin A. F., Kuznetsova Yu. A., Sokolov V. I. // *J. Luminescence*. 2017. V. 183. P. 135.
- [4] Мотт. Н., Дэвис Э. / *Электронные процессы в некристаллических веществах*. // Мир. Москва, 1982. 652 с.
- [5] Гельмонт Б. Л., Перель В. И., Ясиевич И. Н. // ФТТ. 1983. Т. 25. № 3. С. 727.

Основное состояние и спектр возбуждений четырёхножной спиновой трубки: расчёт методом матричных произведений

Тимофеева Анна Сергеевна

Бострем Ирина Геннадьевна

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина

Бострем Ирина Геннадьевна, к.ф.-м.н.

anna.timofeeva@bk.ru

Рассматривается модель четырёхножной спиновой трубки с тремя видами гайзенберговского обменного взаимодействия, одно из которых является фрустрирующим. Кроме того, что само по себе изучение спиновых трубок представляет теоретический интерес, рассматриваемая в работе спиновая система служит упрощенной моделью квазидвумерного органического ферримагнетика VIPNNBNO, синтезированного группой японских физхимиков [1]. Подробный химический состав и физические параметры можно найти в приведенной выше ссылке. Магнитными свойствами обладают только радикалы NO со спином $\frac{1}{2}$. Каждая молекула VIPNNBNO содержит три таких радикала, причем два из них связаны сильным ферромагнитным обменным взаимодействием, и могут рассматриваться как единый узел со спином 1. Органический ферримагнетик демонстрирует характерные для низкоразмерных магнитных систем аномалии на кривой намагничивания (наличие плато намагничивания). Широкое плато в начале кривой намагничивания (4,5 Тл) свидетельствует о наличии щели в энергетическом спектре. Природа появления плато на $1/3$ и $2/3$ намагниченности насыщения были объяснены в предшествующих работах [2]. Там же было высказано предположение, что основную роль в формировании плато основного состояния играет фрустрирующее обменное взаимодействие между спинами $S=1$. Исследование зависимости величины щели основного состояния от фрустрирующего обменного взаимодействия и составляет цель настоящей работы.

Магнитная структура VIPNNBNO представляет из себя набор одномерных спиновых цепочек из молекул ($S=1-s=1/2$), которые связаны внутрицепочечным антиферромагнитным обменным взаимодействием с обменным интегралом J_3 . Ближайшие цепочки связаны также антиферромагнитно через спины $\frac{1}{2}$ (межцепочечный обменный интеграл J_1), а следующие за ближайшими – фрустрирующим антиферромагнитным обменом с интегралом J_2 . Таким образом, если выделить кластер из 4 бесконечных цепочек и наложить циклические граничные условия в перпендикулярном направлении, то мы и получим четырёхножную спиновую трубку.

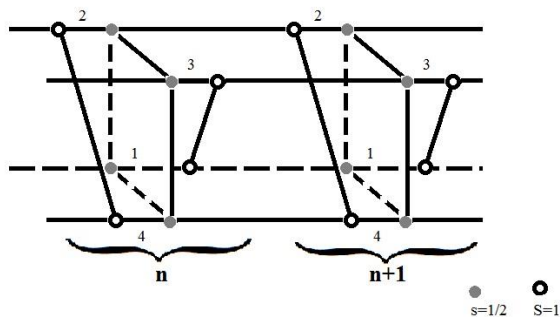


рис.1. Модель четырёхножной спиновой трубки

Модель четырёхножной спиновой трубки представлена на рис.1. Она состоит из повторяющихся блоков $(\dots, n, n+1, \dots)$, связанных между собой. Внутри каждого имеем два вида антиферромагнитного межцепочечного взаимодействия. Полный гамильтониан такой системы содержит блочную и межблочную части. Формулы (1) для нахождения блочного и (2) межблочного вклада в энергию соответственно: